

Translation

PATENT COOPERATION TREATY

PCT/EP2003/008780



PCT

INTERNATIONAL PRELIMINARY EXAMINATION REPORT

(PCT Article 36 and

Rec'd PCT/PTO 04 FEB 2005

Applicant's or agent's file reference	<b>FOR FURTHER ACTION</b> See Notification of Transmittal of International Preliminary Examination Report (Form PCT/IPEA/416)	
International application No. PCT/EP2003/008780	International filing date (day/month/year) 07 August 2003 (07.08.2003)	Priority date (day/month/year) 07 August 2002 (07.08.2002)
International Patent Classification (IPC) or national classification and IPC B01J 31/22, C07F 15/00		
Applicant UMICORE AG & Co. KG		

1. This international preliminary examination report has been prepared by this International Preliminary Examining Authority and is transmitted to the applicant according to Article 36.
2. This REPORT consists of a total of 5 sheets, including this cover sheet.

☐ This report is also accompanied by ANNEXES, i.e., sheets of the description, claims and/or drawings which have been amended and are the basis for this report and/or sheets containing rectifications made before this Authority (see Rule 70.16 and Section 607 of the Administrative Instructions under the PCT).

These annexes consist of a total of \_\_\_\_\_ sheets.

3. This report contains indications relating to the following items:

- I ☒ Basis of the report
- II ☐ Priority
- III ☐ Non-establishment of opinion with regard to novelty, inventive step and industrial applicability
- IV ☐ Lack of unity of invention
- V ☒ Reasoned statement under Article 35(2) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement
- VI ☐ Certain documents cited
- VII ☐ Certain defects in the international application
- VIII ☐ Certain observations on the international application

Date of submission of the demand 14 January 2004 (14.01.2004)	Date of completion of this report 04 November 2004 (04.11.2004)
Name and mailing address of the IPEA/EP	Authorized officer
Facsimile No.	Telephone No.

# INTERNATIONAL PRELIMINARY EXAMINATION REPORT

International application No.

PCT/EP2003/008780

## I. Basis of the report

### 1. With regard to the elements of the international application:\*

- ☒ the international application as originally filed
- ☒ the description:  
 pages \_\_\_\_\_ 1-25 \_\_\_\_\_, as originally filed  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the demand  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the letter of \_\_\_\_\_
- ☒ the claims:  
 pages \_\_\_\_\_ 1-10 \_\_\_\_\_, as originally filed  
 pages \_\_\_\_\_, as amended (together with any statement under Article 19  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the demand  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the letter of \_\_\_\_\_
- ☐ the drawings:  
 pages \_\_\_\_\_, as originally filed  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the demand  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the letter of \_\_\_\_\_
- ☐ the sequence listing part of the description:  
 pages \_\_\_\_\_, as originally filed  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the demand  
 pages \_\_\_\_\_, filed with the letter of \_\_\_\_\_

### 2. With regard to the language, all the elements marked above were available or furnished to this Authority in the language in which the international application was filed, unless otherwise indicated under this item.

- These elements were available or furnished to this Authority in the following language \_\_\_\_\_ which is:
- ☐ the language of a translation furnished for the purposes of international search (under Rule 23.1(b)).
- ☐ the language of publication of the international application (under Rule 48.3(b)).
- ☐ the language of the translation furnished for the purposes of international preliminary examination (under Rule 55.2 and/or 55.3).

### 3. With regard to any nucleotide and/or amino acid sequence disclosed in the international application, the international preliminary examination was carried out on the basis of the sequence listing:

- ☐ contained in the international application in written form.
- ☐ filed together with the international application in computer readable form.
- ☐ furnished subsequently to this Authority in written form.
- ☐ furnished subsequently to this Authority in computer readable form.
- ☐ The statement that the subsequently furnished written sequence listing does not go beyond the disclosure in the international application as filed has been furnished.
- ☐ The statement that the information recorded in computer readable form is identical to the written sequence listing has been furnished.

### 4. ☐ The amendments have resulted in the cancellation of:

- ☐ the description, pages \_\_\_\_\_
- ☐ the claims, Nos. \_\_\_\_\_
- ☐ the drawings, sheets/fig \_\_\_\_\_

### 5. ☐ This report has been established as if (some of) the amendments had not been made, since they have been considered to go beyond the disclosure as filed, as indicated in the Supplemental Box (Rule 70.2(c)).\*\*

\* Replacement sheets which have been furnished to the receiving Office in response to an invitation under Article 14 are referred to in this report as "originally filed" and are not annexed to this report since they do not contain amendments (Rule 70.16 and 70.17).

\*\* Any replacement sheet containing such amendments must be referred to under item 1 and annexed to this report.

# INTERNATIONAL PRELIMINARY EXAMINATION REPORT

International application No.

PCT/EP 03/08780

## V. Reasoned statement under Article 35(2) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement

### 1. Statement

Novelty (N)	Claims	1-10	YES
	Claims		NO
Inventive step (IS)	Claims	1-10	YES
	Claims		NO
Industrial applicability (IA)	Claims	1-10	YES
	Claims		NO

### 2. Citations and explanations

This report makes reference to the documents cited in the search report. Their numbering is based on that of the search report.

The application claims carbene complexes of formula (I) of Ni, Pt and Pd that carry a carbene ligand of general formula (II) or (III) and a ligand with an olefinic, electron-deficient double bond, a method for their production, and their use as catalysts in organic synthesis (figures 1 and 2).

D1 describes palladium dicarbene complexes that carry ligands with an electron-deficient, olefinic double bond (maleic acid anhydride and tetracyanoethene). The carbene ligands are identical to those in the application, but in contrast thereto, the central atom is coordinated with two carbene ligands. The complexes are used in aryl couplings.

D2 claims carbene diene complexes of Ni, Pd and Pt. The carbene ligands are identical to those in the application, the diene ligands (page 3, lines 60-65), however, being electron-rich, in contrast to the double bond in the application. The metal complexes are used as catalysts in Suzuki couplings and Heck reactions.

D3 contains a palladium carbene complex coordinated with dibenzylidene acetone (having two electron-deficient double bonds) (column 7, lines 40-55). The carbene ligand is identical to that in the application. In contrast thereto, however, the central atom is coordinated with two carbene ligands. D3 is not relevant for the evaluation of inventive step, since the complex described therein is merely a proven intermediate stage rather than the starting catalyst.

Owing to the structural differences demonstrated, the novelty of claims 1-10 cannot be acknowledged (PCT Article 33(2)).

D1 is regarded as the closest prior art. It is already known from D1 that Pd carbene complexes that carry a ligand with an electron-deficient double bond are suitable for aryl coupling reactions. The prior art does not indicate, however, that, proceeding from D1, the number of carbene ligands can be reduced without the catalytic activity being compromised. Therefore, the teaching of the application can be regarded as a non-obvious alternative to D1 and, consequently, claims 1-10 can be regarded as involving an inventive step (PCT Article 33(3)).

Claims 1-10 are industrially applicable (PCT Article 33(4)).

The applicant's attention is drawn to the following point for the European phase of the procedure:

In order better to distinguish the application from D2, "electron-deficient" should be better defined. The description on page 9, lines 2-11 could serve as a basis therefor.

# VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS

**PCT** Rec'd PCT/PTO 04 FEB 2005

## INTERNATIONALER VORLÄUFIGER PRÜFUNGSBERICHT

(Artikel 36 und Regel 70 PCT)

REC'D 05 NOV 2004

WIPO

PCT

Aktenzeichen des Anmelders oder Anwalts G5384 PCT	<b>WEITERES VORGEHEN</b> siehe Mitteilung über die Übersendung des internationalen vorläufigen Prüfungsberichts (Formblatt PCT/PEA/416)	
Internationales Aktenzeichen PCT/EP 03/08780	Internationales Anmeldedatum (Tag/Monat/Jahr) 07.08.2003	Prioritätsdatum (Tag/Monat/Jahr) 07.08.2002
Internationale Patentklassifikation (IPK) oder nationale Klassifikation und IPK B01J31/22		
Anmelder UMICORE AG & CO. KG et al.		

1. Dieser internationale vorläufige Prüfungsbericht wurde von der mit der internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde erstellt und wird dem Anmelder gemäß Artikel 36 übermittelt.

2. Dieser BERICHT umfaßt insgesamt 5 Blätter einschließlich dieses Deckblatts.

- ☐ Außerdem liegen dem Bericht ANLAGEN bei; dabei handelt es sich um Blätter mit Beschreibungen, Ansprüchen und/oder Zeichnungen, die geändert wurden und diesem Bericht zugrunde liegen, und/oder Blätter mit vor dieser Behörde vorgenommenen Berichtigungen (siehe Regel 70.16 und Abschnitt 607 der Verwaltungsrichtlinien zum PCT).

Diese Anlagen umfassen insgesamt Blätter.

3. Dieser Bericht enthält Angaben zu folgenden Punkten:

- I ☒ Grundlage des Bescheids
- II ☐ Priorität
- III ☐ Keine Erstellung eines Gutachtens über Neuheit, erfinderische Tätigkeit und gewerbliche Anwendbarkeit
- IV ☐ Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung
- V ☒ Begründete Feststellung nach Regel 66.2 a)ii) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung
- VI ☐ Bestimmte angeführte Unterlagen
- VII ☐ Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung
- VIII ☐ Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung

Datum der Einreichung des Antrags

14.01.2004

Datum der Fertigstellung dieses Berichts

04.11.2004

Name und Postanschrift der mit der internationalen Prüfung beauftragten Behörde

 Europäisches Patentamt  
D-80298 München  
Tel. +49 89 2399 - 0 Tx: 523656 epmu d  
Fax: +49 89 2399 - 4465

Bevollmächtigter Bediensteter

Klaes, D  
Tel. +49 89 2399-7335





# INTERNATIONALER VORLÄUFIGER PRÜFUNGSBERICHT

Internationales Aktenzeichen PCT/EP 03/08780

## I. Grundlage des Berichts

1. Hinsichtlich der **Bestandteile** der internationalen Anmeldung (*Ersatzblätter, die dem Anmeldeamt auf eine Aufforderung nach Artikel 14 hin vorgelegt wurden, gelten im Rahmen dieses Berichts als "ursprünglich eingereicht" und sind ihm nicht beigelegt, weil sie keine Änderungen enthalten (Regeln 70.16 und 70.17)*):

### Beschreibung, Seiten

1-25 in der ursprünglich eingereichten Fassung

### Ansprüche, Nr.

1-10 in der ursprünglich eingereichten Fassung

2. Hinsichtlich der **Sprache**: Alle vorstehend genannten Bestandteile standen der Behörde in der Sprache, in der die internationale Anmeldung eingereicht worden ist, zur Verfügung oder wurden in dieser eingereicht, sofern unter diesem Punkt nichts anderes angegeben ist.

Die Bestandteile standen der Behörde in der Sprache: zur Verfügung bzw. wurden in dieser Sprache eingereicht; dabei handelt es sich um:

- ☐ die Sprache der Übersetzung, die für die Zwecke der internationalen Recherche eingereicht worden ist (nach Regel 23.1(b)).
- ☐ die Veröffentlichungssprache der internationalen Anmeldung (nach Regel 48.3(b)).
- ☐ die Sprache der Übersetzung, die für die Zwecke der internationalen vorläufigen Prüfung eingereicht worden ist (nach Regel 55.2 und/oder 55.3).

3. Hinsichtlich der in der internationalen Anmeldung offenbarten **Nucleotid- und/oder Aminosäuresequenz** ist die internationale vorläufige Prüfung auf der Grundlage des Sequenzprotokolls durchgeführt worden, das:

- ☐ in der internationalen Anmeldung in schriftlicher Form enthalten ist.
- ☐ zusammen mit der internationalen Anmeldung in computerlesbarer Form eingereicht worden ist.
- ☐ bei der Behörde nachträglich in schriftlicher Form eingereicht worden ist.
- ☐ bei der Behörde nachträglich in computerlesbarer Form eingereicht worden ist.
- ☐ Die Erklärung, daß das nachträglich eingereichte schriftliche Sequenzprotokoll nicht über den Offenbarungsgehalt der internationalen Anmeldung im Anmeldezeitpunkt hinausgeht, wurde vorgelegt.
- ☐ Die Erklärung, daß die in computerlesbarer Form erfassten Informationen dem schriftlichen Sequenzprotokoll entsprechen, wurde vorgelegt.

4. Aufgrund der Änderungen sind folgende Unterlagen fortgefallen:

- ☐ Beschreibung,      Seiten:
- ☐ Ansprüche,      Nr.:
- ☐ Zeichnungen,      Blatt:

5. ☐ Dieser Bericht ist ohne Berücksichtigung (von einigen) der Änderungen erstellt worden, da diese aus den angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde über den Offenbarungsgehalt in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgehen (Regel 70.2(c)).

*(Auf Ersatzblätter, die solche Änderungen enthalten, ist unter Punkt 1 hinzuweisen; sie sind diesem Bericht beizufügen.)*

6. Etwaige zusätzliche Bemerkungen:

**V. Begründete Feststellung nach Artikel 35(2) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung**

- |                                |   |
|--------------------------------|---|
| 1. Feststellung                |   |
| Neuheit (N)                    | Ja: Ansprüche 1-10<br>Nein: Ansprüche   |
| Erfinderische Tätigkeit (IS)   | Ja: Ansprüche 1-10<br>Nein: Ansprüche   |
| Gewerbliche Anwendbarkeit (IA) | Ja: Ansprüche: 1-10<br>Nein: Ansprüche: |

2. Unterlagen und Erklärungen:

**siehe Beiblatt**

**Zu Punkt V**

**Begründete Feststellung nach Regel 66.2(a)(ii) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung**

Es wird auf die im Recherchenbericht zitierten Dokumente verwiesen. Ihre Numerierung orientiert sich an ihrer Reihenfolge darin.

Die Anmeldung beansprucht Carbenkomplexe der Formel (I) des Ni, Pt und Pd, die einen Carbenliganden der allgemeinen Formel (II) oder (III) und einen Liganden mit olefinsicher elektronenarmer Doppelbindung tragen, ein Verfahren zu ihrer Herstellung und ihre Anwendung als Katalysatoren in der organischen Synthese (Schemata 1 und 2).

D1 beschreibt Palladium-Dicarbenkomplexe, die Liganden mit elektronenarmer, olefinsicher Doppelbindung tragen (Maleinsäureanhydrid und Tetracyanoethen). Die Carbenliganden sind identisch mit denen der Anmeldung, jedoch ist das Zentralatom im Gegensatz zu dieser mit zwei Carbenliganden koordiniert. Die Komplexe werden in Arylkupplungen eingesetzt.

D2 beansprucht Carben-Dien-Komplexe des Ni, Pd und Pt. Die Carbenliganden sind identisch mit denen der Anmeldung, die Dienliganden (S. 3, Z. 60-65) im Gegensatz zu der Doppelbindung der Anmeldung jedoch elektronenreich. Die Metallkomplexe werden als Katalysatoren in Suzuki-Kupplungen und Heckreaktionen eingesetzt.

D3 beinhaltet einen Palladiumcarbenkomplex, der mit Dibenzylidenaceton (besitzt zwei elektronenarme Doppelbindungen) koordiniert sind (Spalte 7, I. 40-55). Der Carbenligand ist identisch mit dem der Anmeldung. Im Gegensatz zu dieser ist das Zentralatom allerdings mit zwei Carbenliganden koordiniert. Für die Betrachtung der erfinderischen Tätigkeit ist D3 nicht relevant, da es sich bei dem beschriebenen Komplex lediglich um eine nachgewiesene Zwischenstufe und nicht um den Ausgangskatalysator handelt.

Auf Grund der aufgezeigten strukturellen Unterschiede kann die Neuheit der Ansprüche 1-10 anerkannt werden (Art. 33 (2) PCT).

Als nächstliegender Stand der Technik ist D1 zu sehen. Aus D1 ist bereits bekannt, daß Pd-Carbenkomplexe, die einen Liganden mit elektronenarmer Doppelbindung tragen, für Arylkupplungsreaktionen geeignet sind. Aus dem Stand der Technik geht jedoch nicht hervor, dass ausgehend von D1 die Anzahl der Carbenliganden reduziert werden kann,



ohne dass die katalytische Aktivität darunter leidet. Daher kann die Lehre der Anmeldung als nicht offensichtliche Alternative zu D1 gesehen werden und somit die erfinderische Tätigkeit der Ansprüche 1-10 anerkannt werden (Art. 33 (3) PCT).

Die Ansprüche 1-10 sind gewerblich anwendbar (Art. 33 (4) PCT).

Für die Europäische Phase sei der Anmelder auf folgenden Punkt aufmerksam gemacht:

Zur besseren Unterscheidung von D2 sollte "elektronenarm" besser definiert werden. Als Basis hierfür könnte die Beschreibung S.9, Z.2-11 dienen.